

МЕТОД РАСЧЕТА КОЭФФИЦИЕНТОВ ДИФФУЗИИ ПРИ КОНДЕНСАЦИИ ВОДЯНОГО ПАРА ИЗ ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ ГАЗООБРАЗНОГО ТОПЛИВА В ТЕПЛОУТИЛИЗАЦИОННЫХ АППАРАТАХ КОТЕЛЬНЫХ УСТАНОВОК

А.В. Ефимов, доктор техн. наук,
Л.В. Гончаренко, канд. техн. наук,
А.Л. Гончаренко, инженер,

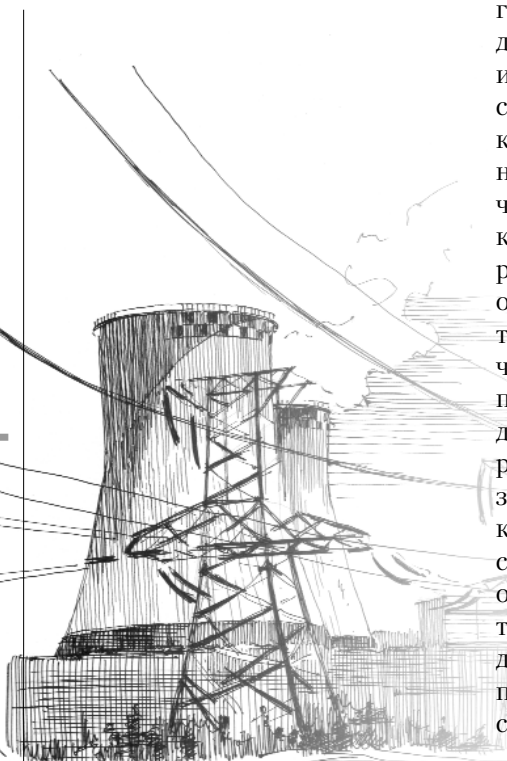
НТУ «Харьковский политехнический институт»

Одним из перспективных способов снижения энергетического дефицита в нашей стране является внедрение на промышленных предприятиях и в сфере коммунального хозяйства энергосберегающих технологий. При решении задач энергосбережения в настоящее время все более широкое распространение получают теплоутилизационные системы, использующие низкопотенциальную теплоту уходящих из котлов продуктов сгорания топлива в системах теплоснабжения и горячего водоснабжения.

При охлаждении уходящих газов ниже точки росы происходит конденсация водяных паров из парогазовой смеси, которая сопровождается совместно протекающими процессами теплообмена и массообмена. Тепловой расчет теплообменного аппарата конденсационного типа неразрывно связан с необходимостью определения коэффициентов теплоотдачи и массоотдачи. Расчет коэффициентов теплоотдачи при этом осуществляется по достаточно надежным и апробированным методам и не вызывает затруднений. Определение же коэффициентов массоотдачи в связи со сложностью процесса и ограниченностью экспериментальных и теоретических исследований для многокомпонентных парогазовых смесей с большим содержанием инертных газов ока-

зывается достаточно сложной задачей. Это обусловлено изменением параметров парогазовой смеси и конденсатной пленки вдоль поверхности теплообмена и косвенным методом определения их значений на границе раздела фаз. Точность расчета коэффициентов массоотдачи зависит от достоверности значений коэффициентов диффузии водяного пара в сухие продукты сгорания топлива. Значения таких коэффициентов диффузии, полученные экспериментальным путем, практически отсутствуют в связи со сложностью проведения экспериментальных исследований. Как правило, в литературе приводятся опытные данные для коэффициентов диффузии водяного пара в воздух и различные формулы для расчетного определения коэффициентов диффузии для бинарных сред [1–6].

Целью настоящей статьи является анализ известных из литературных источников расчетных методов определения бинарных коэффициентов диффузии водяного пара в различные газы, оценка достоверности этих методов путем сравнения результатов расчетов с имеющимися опытными данными и разработка на этой основе достаточно надежного и достоверного метода расчета коэффициентов диффузии водяного пара в многокомпонентные сухие продукты сгорания топли-



ва.

В работах [1–4] приведены следующие зависимости для определения бинарного коэффициента диффузии:

$$D_{AB} = 0,043 \frac{T^{3/2} \cdot 10^{-5}}{p(\nu_A^{1/3} + \nu_B^{1/3})^2} \sqrt{\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}}; \quad (1)$$

$$D_{AB} = 0,00792 \frac{T^{1,78} \cdot 10^{-5}}{p(\nu_A^{1/3} + \nu_B^{1/3})^2} \left[\frac{1}{\sqrt{M_A \cdot M_B}} + \sqrt{\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}} \right]; \quad (2)$$

$$D_{AB} = 1,013 \frac{T^{1,75} \cdot 10^{-7}}{p \left[\left(\sum_A \nu_i \right)^{1/3} + \left(\sum_B \nu_i \right)^{1/3} \right]^2} \left[\sqrt{\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}} \right]. \quad (3)$$

В формулах (1)–(4) приняты следующие обозначения: D_{AB} – бинарный коэффициент диффузии компонента A в компонент B , м²/с; ν_A, ν_B – молекулярные диффузионные объемы компонентов A и B , см³/моль; M_A, M_B – молекулярные массы компонентов A и B , кг/кмоль; T – абсолютная температура смеси, К; p – общее давление смеси, кгс/см². В формуле (3) $\sum_A \nu_i$ и $\sum_B \nu_i$ соответствуют обозначенным в зависимостях (1) и (2) молекулярным диффузионным объемам ν_A и ν_B .

Молекулярные диффузионные объемы компонентов смеси ν_A, ν_B обычно выбираются из справочных таблиц, приведенных, например, в [2–5], или рассчитываются путем суммирования атомных диффузионных объемов, приведенных в тех же таблицах. Атомные и молекулярные диффузионные объемы компонентов, входящих в продукты сгорания газообразного топлива котельных установок, приведены в табл.1.

Как видно из табл.1, значения атомных и молеку-

лярных диффузионных объемов, приведенные в работах [2,3,5] и [4], существенно отличаются. Кроме того, расчет молекулярных объемов газов путем суммирования атомных объемов, как это предлагают авторы приведенных выше работ, не совпадает с табличными данными. Например, в соответствии с данными [4]: $\nu_{H_2O} = 2\nu_H + \nu_O = 2 \cdot 1,98 + 5,48 = 9,44$ см³/моль вместо 12,7 см³/моль; по данным [2,3,5] $\nu_{H_2O} = 2\nu_H + \nu_O = 2 \cdot 3,7 + 7,4 = 14,8$ см³/моль вместо 18,9 см³/моль. Это вызывает определенные затруднения в расчетах диффузионных объемов компонентов парогазовой смеси и в оценке достоверности их результатов.

В работе [6] предлагается несколько иной метод определения коэффициентов диффузии бинарных систем, основанный на молекулярно-кинетической теории взаимодействия веществ, в соответствии с которым

$$D_{AB} = 1,8583 \frac{T^{3/2} \cdot 10^{-7}}{p \sigma_{AB}^2 \Omega_D} \sqrt{\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}}, \quad (4)$$

где p – давление, кгс/см²; σ_{AB} – средний диаметр зоны столкновения молекул веществ A и B , который измеряется в ангстремах \AA и находится по формуле $\sigma_{AB} = (\sigma_A + \sigma_B)/2$, где σ_A и σ_B – диаметры молекул веществ A и B , \AA ; Ω_D – диффузионный интеграл взаимодействия веществ A и B . Значения σ веществ A и B находятся по табл.2, которая составлена на основе данных работы [6]. Для определения Ω_D необходимо из этой же таблицы выбрать значения отношений параметров ϵ_A/K_B и ϵ_B/K_B (здесь ϵ_A и ϵ_B – потенциальная энергия молекул веществ A и B , K_B – постоянная Больцмана) и рассчитать величину ϵ_{AB}/K_B по формуле

$$\epsilon_{AB} / K_B = \sqrt{(\epsilon_A / K_B)(\epsilon_B / K_B)},$$

где ϵ_{AB} – потенциальная энергия взаимодействия молекул веществ A и B . После этого для заданного значения температуры смеси T определяется параметр $K_B T / \epsilon_{AB}$, по которому в соответствии с табл.3 находится диффузионный интеграл Ω_D .

Таблица 1

Атомные и молекулярные диффузионные объемы, см³/моль

Источник информации	Вещество								
	C	N ₂	O	O ₂	H	H ₂	H ₂ O	CO ₂	воздух
[4]	16,5	17,9	5,48	16,6	1,98	7,07	12,7	26,9	20,1
[2,3,5]	14,8	31,2	7,4	5,6	3,7	14,3	18,9	34,0	29,9

Таблица 2

Постоянные Lennard–Jones и молекулярные массы веществ [6]

Вещество	$\sigma, \text{\AA}$	$\epsilon / K_B, \text{K}$	$M, \text{кг/кмоль}$
H ₂ O	2,655	363	18,02
CO ₂	3,941	195,2	44,01
N ₂	3,798	71,4	28,01
Воздух	3,711	78,6	28,96

Формулы (1)–(4) предназначены для расчета бинарных коэффициентов диффузии. В соответствии с этим для оценки их надежности и достоверности нами были выполнены расчеты коэффициентов диффузии для системы «водяной пар–воздух», поскольку в литературе имеются экспериментальные данные для таких бинарных систем. Например, по данным работы [2] $D_{AB} = 2,2 \cdot 10^{-5}$ м²/с, по данным [4] $D_{AB} = 2,26 \cdot 10^{-5}$ м²/с, по данным [5]

$D_{AB} = 2,19 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$ при $T=273 \text{ К}$ и $p = 0,0981 \text{ МПа}$ ($1 \text{ кгс}/\text{см}^2$). По данным [6] $D_{AB} = 2,88 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$ при $T=313 \text{ К}$ и $p = 0,0981 \text{ МПа}$. Так как зависимость коэффициента диффузии от давления и температуры имеет вид

$$D = D_0 \frac{p_0}{p} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1,5},$$

то при $T=273 \text{ К}$ и $p = 0,0981 \text{ МПа}$ $D_{AB} = 2,34 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$. Для сравнения расчетных данных с опытными последние удобно усреднить, среднее значение D_{AB} в этом случае составляет $2,25 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$.

Расчеты коэффициентов диффузии выполнялись при $T=323 \text{ К}$ и $p = 0,0981 \text{ МПа}$. При этом в формулах (1)–(3) использовались данные по диффузионным объемам, приведенные в [2] и [4]. Расчет по формуле (4) осуществлялся следующим образом. В соответствии с табл.2 для водяного пара $\sigma_A = 2,655 \text{ А}$, $M_A = 18,02 \text{ кг}/\text{кмоль}$; для воздуха $\sigma_B = 3,711 \text{ А}$, $M_B = 28,96 \text{ кг}/\text{кмоль}$; $\sigma_{AB} = (2,655+3,711)/2=3,183 \text{ А}$; $\varepsilon_A/K_B = 363 \text{ К}$; $\varepsilon_B/K_B = 78,6 \text{ К}$; $\varepsilon_{AB}/K_B = \sqrt{363 \cdot 78,6} = 168,91 \text{ К}$; $K_B T/\varepsilon_{AB} = 323/168,91=192,23$. По значению $K_B T/\varepsilon_{AB}$ с помощью табл. 3 находится $\Omega_D = 1,0915$. Тогда бинарный коэффициент диффузии, рассчитанный по формуле (4), составляет $D_{AB} = 2,93 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$.

Необходимо отметить, что в работе [7] расчет коэффициента диффузии водяного пара в воздух, отнесенного к градиенту парциального давления водяного пара, осуществляется по формуле

$$D_p = \frac{6,27 \cdot 10^{-6}}{p} \left(\frac{T}{273} \right)^{0,8}. \quad (5)$$

Учитывая то, что $D_{AB} = D_p \cdot R_{II} \cdot T$ (R_{II} – удельная газовая постоянная водяного пара), имеем при $T = 323 \text{ К}$ и $p = 0,0981 \text{ МПа}$ $D_{AB} = 3,03 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$.

Результаты расчетов и их сравнение со средним значением экспериментальных данных, равном $2,25 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$, приведены в табл.4.

Анализ результатов расчета бинарного коэффициента диффузии для системы «водяной пар–воздух» свидетельствует о достаточно хорошем совпадении среднего экспериментального значения D_{AB} с расчетными, полученными с помощью формул (1) и (3) и данных [4] по диффузионным объемам, а также по формулам (4) и (5).

Так как продукты сгорания топлива представляют собой

Таблица 3

Диффузионные интегралы [6]

$K_B T / \varepsilon_{AB}$	1,00	1,05	1,10	1,15	1,20	1,25	1,30	1,35	1,40
Ω_D	1,439	1,406	1,375	1,346	1,320	1,296	1,273	1,253	1,233
$K_B T / \varepsilon_{AB}$	1,45	1,50	1,55	1,60	1,65	1,70	1,75	1,80	1,85
Ω_D	1,215	1,198	1,182	1,167	1,153	1,140	1,128	1,116	1,105
$K_B T / \varepsilon_{AB}$	1,90	1,95	2,00	2,10	2,20	2,30	2,40	2,50	2,60
Ω_D	1,094	1,084	1,075	1,057	1,041	1,026	1,012	0,9996	0,988

многокомпонентную среду, то расчет коэффициентов диффузии водяного пара в смесь сухих инертных газов следует осуществлять путем определения бинарных коэффициентов диффузии водяного пара в каждый из компонентов смеси с последующим их усреднением по формуле

$$D_{im} = 1 / \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{y_j}{D_{ij}}, \quad (6)$$

где $i = 0$ – диффузионный компонент (водяной пар); j – компонент смеси сухих инертных газов (CO_2 , N_2 , воздух), в который диффундирует водяной пар, соответственно $j = 1, 2, 3$; n – количество компонентов смеси сухих инертных газов; D_{ij} – бинарные коэффициенты диффузии.

Учитывая то, что мольная доля компонента смеси равна отношению его парциального давления к общему давлению смеси, $y_j = p_j/p$, $p_j = V_j p/V$, где V_j – объем компонента смеси, $\text{м}^3/\text{м}^3$ топлива, V – общий объем сухих инертных газов, $\text{м}^3/\text{м}^3$ топлива, то $y_j = V_j/V = r_j$, где r_j – объемная доля сухих продуктов сгорания топлива. При расчете процесса горения газообразного топлива объем сухих газов определяется следующим образом: $V_{CG} = V_{\text{CO}_2} + V_{\text{N}_2} + (\alpha - 1)V^0$, где V_{CO_2} , V_{N_2} и V^0 – соответственно объемы CO_2 , N_2 и воздуха при коэффициенте его избытка $\alpha = 1$, отнесенные к единице расхода топлива, $\text{м}^3/\text{м}^3$

Таблица 4

Результаты расчетов бинарных коэффициентов диффузии

Номер формулы и источник информации для расчета диффузионных объемов	Расчетное значение $D_{AB} \cdot 10^5$, $\text{м}^2/\text{с}$	Отклонение расчетных данных от среднего значения экспериментальных данных, %
(1), [2]	2,4	17,1
(2), [2]	2,5	13,7
(3), [2]	2,26	23,0
(1), [4]	3,13	8,1
(2), [4]	3,19	10,1
(3), [4]	2,94	1,5
(4)	2,93	1,2
(5)	3,03	4,3

ВЫВОДЫ

топлива. Объемные доли сухих продуктов сгорания топлива находятся из соотношений:

$$r_j = r_{CO_2} = V_{CO_2} / V_{CF}; \quad r_j = r_{N_2} = V_{N_2} / V_{CF};$$

$$r_j = r_{вод} = (\alpha - 1) V^0 / V_{CF}.$$

Формулу (6) в этом случае можно представить в следующем виде:

$$D_{im} = 1 / \sum_{j=1, j \neq i}^n \frac{r_j}{D_{ij}}. \quad (7)$$

1. Достаточно достоверные данные по коэффициентам диффузии водяного пара в многокомпонентную смесь сухих продуктов сгорания газообразного топлива котельных установок могут быть получены с помощью формул (1), (3) и (4). При этом в формулах (1) и (3) следует использовать данные [4] по диффузионным объемам.

2. Замена многокомпонентной смеси сухих про-

Таблица 5

Результаты расчетов коэффициентов диффузии водяного пара в сухие продукты сгорания топлива

Коэффициент диффузии	Формула (1), [4]	Формула (3), [4]	Формула (4)
$D_{ij} \cdot 10^5, j = 1$	2,62	2,43	2,11
$D_{ij} \cdot 10^5, j = 2$	3,28	3,04	2,91
$D_{ij} \cdot 10^5, j = 3$	3,13	2,9	2,93
$D_{im} \cdot 10^5, \text{ формула (7)}$	3,17	2,94	2,82

В качестве примера для заданного состава сухих продуктов сгорания газообразного топлива (коэффициент избытка воздуха $\alpha = 1,25$): $V_{CO_2} = 0,99 \text{ м}^3/\text{м}^3$, $V_{N_2} = 7,46 \text{ м}^3/\text{м}^3$, $V_{вод} = 2,36 \text{ м}^3/\text{м}^3$ определены объемные доли газов: $r_{CO_2} = 0,0916$, $r_{N_2} = 0,6901$, $r_{вод} = 0,2183$ и выполнен расчет бинарных и среднего коэффициентов диффузии при $T = 323 \text{ К}$ и $p = \text{МПа}$. Результаты расчетов по формулам (1) и (3) с использованием данных [4] по диффузионным объемам, а также по формулам (4) и (7) приведены в табл.5.

Расчет коэффициентов диффузии водяного пара в сухие инертные газы можно упростить, если диффузионные объемы и молекулярные массы последних определять по таким формулам:

$$v_{CF} = \sum_{j=1}^n r_j \cdot v_j; \quad M_{CF} = \sum_{j=1}^n r_j \cdot M_j, \quad (8)$$

где v_j и M_j – диффузионные объемы и молекулярные массы компонентов смеси сухих газов.

Для приведенного выше состава смеси сухих газов при использовании данных [4] по диффузионным объемам (табл.1) и по молекулярным массам (табл.2) имеем $v_{CF} = 19,22 \text{ см}^3/\text{моль}$; $M_{CF} = 29,687 \text{ кг/моль}$. Тогда в соответствии, например, с формулой (3), в которую вместо v_B и M_B следует подставить величины v_{CF} и M_{CF} , бинарный коэффициент диффузии равен $D_{AB} = 2,93 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$. Это значение практически совпадает с ранее найденной величиной $D_{im} = 2,94 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$.

дуктов сгорания топлива на однокомпонентную среду с использованием для расчета диффузионных объемов и молекулярных масс сухих инертных газов формул (8) позволяет существенно упростить метод расчета коэффициентов диффузии при конденсации водяных паров из продуктов сгорания газообразного топлива в теплоутилизационных аппаратах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Касаткин А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии. – М.: Химия, 1973. – 470 с.
2. Флореа О., Смигельский О. Расчеты по процессам и аппаратам химической технологии. – М.: Химия, 1971. – 448 с.
3. Машины и аппараты химических производств / Под ред. И.И. Чернобыльского. – М.: Машиностроение, 1975. – 456 с.
4. Справочник по теплообменникам: В 2-х т. Т. 2/- С74. Пер. с англ. – М.: Энергоиздат, 1987. – 352 с.
5. Павлов К.Ф., Романков П.Г., Носков А.А. Примеры и задачи по курсу процессов и аппаратов химической технологии. – Л.: Химия, 1987. – 576 с.
6. John H. Lienhard IV, John H. Lienhard V. A heat transfer textbook third edition, Phlogiston press Cambridge, Massachusetts. USA. – 2004.
7. Берман Л.Д., Фукс С.Н. Расчет поверхностных теплообменных аппаратов для конденсации пара из паровоздушной смеси // Теплоэнергетика. – 1959. – №7. – С. 74–84.